



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2013년11월11일
(11) 등록번호 10-1327723
(24) 등록일자 2013년11월04일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 27/06 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2008-7020877
(22) 출원일자(국제) 2007년02월27일
심사청구일자 2012년02월24일
(85) 번역문제출일자 2008년08월26일
(65) 공개번호 10-2008-0113204
(43) 공개일자 2008년12월29일
(86) 국제출원번호 PCT/US2007/005361
(87) 국제공개번호 WO 2008/063209
국제공개일자 2008년05월29일
(30) 우선권주장
60/777,131 2006년02월27일 미국(US)
(56) 선행기술조사문헌
US20030189202 A1
US20050024790 A1
US20050196707 A1
전체 청구항 수 : 총 13 항

(73) 특허권자
로스 알라모스 내셔널 씨큐어리티 엘엘씨
미합중국 뉴멕시코 87545 로스 알라모스 엠에스
에이187 엘씨/아이피 로스 알라모스 내셔널 라보
라토리
(72) 발명자
블랙, 마르시에, 알.
미국 87544 뉴멕시코주 로스 알라모스 47번 스트
리트 2224
(74) 대리인
백만기, 정은진, 양영준

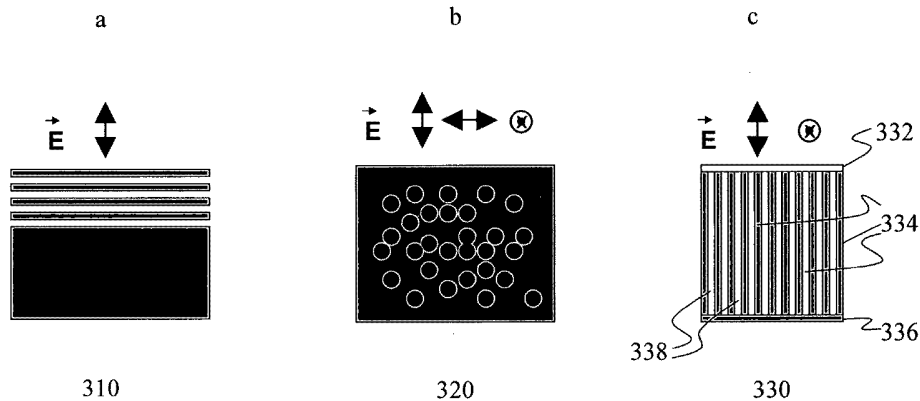
심사관 : 오순영

(54) 발명의 명칭 향상된 전자 전이를 갖는 물질을 포함한 광전 장치

(57) 요약

향상된 전자 전이를 갖는 물질을 포함하는 광전 장치가 개시된다. 전자 전이는 계면에서 전자 상태들을 혼합하
므로써 향상된다. 계면은 나노-웰, 나노-도트, 또는 나노-와이어로 형성될 수 있다.

대표도



특허청구의 범위

청구항 1

광전 장치로서,

a. 투명 도체,

b. 고체 도체, 및

c. 상기 투명 도체와 상기 고체 도체 사이에 배치되는 물질 - 상기 물질의 적어도 일부 또는 전부는 상기 투명 도체 및 상기 고체 도체와 전기적 접촉을 이루고, 상기 물질은 페르미 에너지 준위, 계면(interface), 및 복수의 반송자 포켓들을 가지고, 상기 계면에서의 전자 상태들의 상당한(significant) 혼합이 달성되어 혼합된 전자 상태들을 유발하고, 상기 혼합된 전자 상태들은 페르미 에너지 준위의 아래 또는 kT 내에 있는 초기 상태 및 페르미 에너지 준위 보다 크거나 또는 kT 내에 있는 제2 상태를 포함하며, 여기서 k 는 볼츠만 상수이고 T 는 켈빈 온도임 - 을 포함하는 광전 장치.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 광전 장치는 발광 다이오드, 적외선 검출기, 방사체(emitter), 태양 전지(solar cell), 및 광전지(photovoltaic cell) 중 하나인 광전 장치.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 물질은 실리콘, 비스무스, 아연, 아연 셀파이드, 인듐 포스파이드, 인듐 아세나이드 및 그들의 조합으로 이루어진 그룹에서 선택되는 물질(substance)을 포함하는 광전 장치.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 물질은 나노-웰(nano-well), 나노-도트(nano-dot) 및 나노-와이어(nano-wire) 중 적어도 하나를 포함하는 광전 장치.

청구항 5

제4항에 있어서,

상기 물질은 최대 200nm의 직경을 갖는 나노-와이어를 포함하는 광전 장치.

청구항 6

제5항에 있어서,

상기 물질은 복수의 나노-와이어를 포함하고, 상기 복수의 나노-와이어 각각은 결정 배향 $\langle hkl \rangle$ 을 가지며, $h+k+l=0$, $-h+k+l=0$, $h-k+l=0$ 또는 $h+k-l=0$ 이고, $h \neq 0$, $k \neq 0$ 및 $l \neq 0$ 인 광전 장치.

청구항 7

제4항에 있어서,

상기 물질은 복수의 나노-와이어를 포함하고, 상기 복수의 나노-와이어는 실리콘 나노-와이어들을 포함하며, 상기 실리콘 나노-와이어 각각은 $\langle 1-21 \rangle$, $\langle 211 \rangle$, $\langle 121 \rangle$ 및 $\langle 112 \rangle$ 배향으로 이루어진 그룹에서 선택된 결정 배향의 방향을 갖는 광전 장치.

청구항 8

제4항에 있어서,

상기 물질은 복수의 나노-와이어를 포함하고, 상기 복수의 나노-와이어는 비스무스 나노-와이어들을 포함하며, 상기 비스무스 나노-와이어 각각은 <101> 및 <012> 배향으로 이루어진 그룹에서 선택된 결정 배향의 방향을 갖는 광전 장치.

청구항 9

제4항에 있어서,

상기 물질은 상기 투명 도체와 상기 고체 도체 사이에 배치된 복수의 나노-와이어를 포함하며, 상기 복수의 나노-와이어의 적어도 일부 또는 전부는 상기 투명 도체 및 상기 고체 도체와 전기적 접촉을 이루는 광전 장치.

청구항 10

제9항에 있어서,

상기 복수의 나노-와이어 사이에 배치되는 절연 물질을 더 포함하는 광전 장치.

청구항 11

제10항에 있어서,

상기 절연 물질은 알루미늄을 포함하는 광전 장치.

청구항 12

삭제

청구항 13

삭제

청구항 14

삭제

청구항 15

삭제

청구항 16

삭제

청구항 17

삭제

청구항 18

삭제

청구항 19

삭제

청구항 20

삭제

청구항 21

삭제

청구항 22

삭제

청구항 23

삭제

청구항 24

삭제

청구항 25

삭제

청구항 26

삭제

청구항 27

삭제

청구항 28

삭제

청구항 29

삭제

청구항 30

삭제

청구항 31

삭제

청구항 32

제2항에 있어서,

상기 광전 장치는 중간 대역 태양 전지(intermediate band solar cell)인 광전 장치.

청구항 33

제32항에 있어서,

상기 물질은 실리콘을 포함하고, Γ 점 가전자대에서 L점 전도대로의 전자 전이(Γ point valence band to L-point conduction band electronic transition)가 증가되어 1.65와 2.29 eV 사이에 있는 광전 장치.

명세서

[0001] <관련 출원>

[0002] 이 출원은 2006년 2월 27일자로 출원된 미국 가출원 제60/777,131호의 이익을 주장한다.

[0003] <연방 정부 권리에 관한 선언문>

[0004] 이 발명은 미국 에너지국에 의해 수여받은 약정 제DE-AC51-06NA25396호 하에서 정부 지원에 의해 이루어졌다. 미국 정부는 본 발명에 일정한 권리를 갖는다.

배경 기술

- [0005] 본 발명은 광학 물질(optical material) 및 장치에 관한 것이다. 상세하게는, 본 발명은 전자 상태들의 계면 혼합이 일어나는 광학 물질 및 장치에 관한 것이다. 더 상세하게는, 본 발명은 이런 광학 물질을 포함하는 나노-와이어(nano-wire)에 관한 것이다.
- [0006] 태양 전지(solar cell), 방사선 검출기 및 발광 다이오드와 같은 광전 장치들(optoelectronic device)은 일반적으로 반도체성 물질의 벌크 효과(bulk effect)에 의존한다. 이런 상황 하에서는, 단일 대역-갭으로의 접근이 가능하여, 이런 장치들의 전체 효율은 이로써 상위값으로 제한된다. 방사선 검출기 또는 발광 다이오드 등의 다른 응용에서, 대역-갭은 방출 또는 검출 에너지를 결정한다. 예를 들어, 단일 대역-갭을 갖는 태양 전지들은 약 41% 보다 낮은 효율로 제한된다.
- [0007] 중간 대역-갭 물질들을 이용하여 효율을 증가시키는 개념이 제안되었다. 이런 물질들을 얻는 해결방안은 호스트(host) 물질 내부에 양자 도트를 포함함으로써 중간 대역을 제공하는 것을 포함한다.
- [0008] 벌크 상태 시에는 중간 대역-갭으로의 접근이 불가능하다. 중간 대역-갭 물질을 활용하여 장치들을 제조하려는 시도에는 복합 물질 어셈블리 기술(complex material assembly technique)이 요구되며, 일반적으로 오늘날까지 성공적이지 못했다. 그러므로, 필요한 것은 중간 대역-갭 물질을 포함한 광전 장치이다.

발명의 상세한 설명

- [0009] 본 발명은 벌크 물질에서 미약한 것으로 여겨지는 전자 전이를 의도적으로 향상시킨 광전 장치를 제공함으로써 상기 및 기타의 요구에 부응한다. 이들 전자 장치 상태들은 나노-웰(nano-well), 나노-도트(nano-dot) 또는 나노-와이어(nano-wire)에서 형성될 수 있는 계면에서의 전자 상태들을 혼합함에 의해 접근된다. 일 실시예에서, 광전 장치는 중간 대역-갭 물질을 포함한다.
- [0010] 따라서, 본 발명의 제1 양태는 광전 장치를 제공하기 위한 것이다. 이 장치는 투명 도체, 고체 도체 및 투명 도체와 고체(solid) 도체 사이에 배치되어 적어도 일부가 투명 도체 및 고체 도체와 전기적 접촉을 이루는 물질을 포함한다. 이 물질은 페르미 에너지 준위를 갖는 물질을 포함한다. 이 물질은 계면에서 혼합된 전자 상태들을 가지며, 페르미 에너지 준위의 kT 아래 또는 그 내에 있는 초기 상태 및 페르미 에너지 준위의 kT 보다 높거나 또는 그 내에 있는 제2 상태를 포함한 복수의 반송자 포켓을 가지며, 여기서 k 는 볼츠만 상수이고 T 는 켈빈 온도이다. 이 물질은 계면에서 소정의 대칭 붕괴를 갖는다.
- [0011] 본 발명의 제2 양태는 향상된 전자 전이를 갖는 물질을 제공하기 위한 것이다. 이 물질은 페르미 에너지 준위를 갖는다. 중간 대역-갭 물질은 계면에서 혼합된 전자 상태들을 가지며, 페르미 에너지 준위의 kT 아래 또는 그 내에 있는 초기 상태 및 페르미 에너지 준위의 kT 보다 높거나 또는 그 내에 있는 제2 상태를 포함한 복수의 반송자 포켓을 가지며, 여기서 k 는 볼츠만 상수이고 T 는 켈빈 온도이다. 이 중간 대역-갭 물질은 계면에서 소정의 대칭 붕괴를 갖는다.
- [0012] 본 발명의 제3 양태는 광전 장치를 제공하기 위한 것이다. 광전 장치는 투명 도체, 고체 도체, 및 투명 도체와 고체 도체 사이에 배치되어 적어도 일부가 투명 도체 및 고체 도체와 전기적 접촉을 이루는 복수의 나노-와이어를 포함한다. 복수의 나노-와이어는 향상된 전자 전이를 갖는 물질을 포함한다. 이 물질은 페르미 에너지 준위, 계면에서 혼합된 전자 상태들 및 페르미 에너지 준위의 kT 아래 또는 그 내에 있는 초기 상태 및 페르미 에너지 준위의 kT 보다 높거나 또는 그 내에 있는 제2 상태를 포함한 복수의 반송자 포켓을 가지며, 여기서 k 는 볼츠만 상수이고 T 는 켈빈 온도이다. 이 물질은 계면에서 소정의 대칭 붕괴를 가지며, 복수의 나노-와이어 각각은 소정의 결정 배향으로의 방향을 갖는다.
- [0013] 본 발명의 이들 및 기타의 양태, 이점 및 두드러진 특징들은 이하의 "발명의 상세한 설명", 첨부된 도면 및 첨부된 청구범위로부터 명백해질 것이다.

실시예

- [0017] 이하의 기술에서는, 도면 전체에 걸쳐 동일한 참조 부호는 동일하거나 대응하는 부분을 가리킨다. 또한, "상부(top)", "하부(bottom)", "외향(outward)", "내향(inward)" 등의 용어들은 편의상 기술한 것으로, 해당 용어들에 제한적인 뜻으로 해석되어서는 안 된다. 아울러, 소정의 그룹을 일군의 소자들 및 그들의 조합 중 적어도 하나를 포함하거나 구성되는 것으로 기술한 경우에도, 그 그룹은 인용된 임의의 개수의 소자를 개별적으로 또는

서로 조합하여 포함하거나 구성될 수 있음에 유의해야 한다.

[0018] 도면을 전반적으로 살펴보면, 본 발명에 대한 기술들은 특정 실시예 및 특징들을 기술할 목적으로 예시한 것이지, 본 발명을 제한하려는 의도는 아닌 것임을 이해해야 한다.

[0019] 중간 대역-갭 광전지 장치 또는 중간 대역-갭 물질에서, 중간 대역은 서브 대역-갭 방사선을 포착하도록 기능할 수 있으므로, 광전류를 생성하는 광자들의 에너지 범위가 증가한다. 자유 반송자들이 중간 레벨에서 충분히 오랫동안 생존하면, 제2 광자가 중간 레벨로부터 대역 에지(edge)로 전자를 여기시킬 수 있으므로, 전류는 거의 또는 전혀 손실 없이 개방 전류 전압까지 증가한다. A. Luque 및 그 외 사람들에 의해 제안되고("Increasing the efficiency of Ideal Solar Cells by Photon Induced Transitions at Intermediate levels", Phys. Rev. Lett. 78(26) (1997) pp. 5014-5017), 인용에 의해 본원에 포함되는 계산(calculation)에 기초하여, 중간 대역을 이용함으로써 약 63%의 최대 효율을 얻을 수 있다. 이러한 효율을 달성하기 위해서는 1.95eV의 대역-갭 및 0.71eV 또는 1.24eV의 결함 준위(defect level)가 요구된다. 그러나, 광범위한 대역-갭의 경우는 약 60%보다 높은 효율을 얻을 수 있다.

[0020] 나노-구조화된 물질들은 향상시키지 않을 경우 미약한 전자 전이를 향상시키는 기회를 제공함으로써, 검출기, 방사체(emitter) 및 태양 전지의 설계 시 더 많은 자유를 허용한다. 방사체 및 검출기 등의 다른 유형의 광전 장치들의 경우, 전자 상태들의 혼합에 의해 새로운 방사 또는 검출 에너지가 만들어진다. 선택된 전자 전이를 향상시킴으로써, 본 발명은 중-적외선 및 원-적외선(약 10 μ m); 청색(blue) 자외선 및 근자외선(약310-420nm); 및 적색(red) 자외선(약 550-700nm)의 파장에 대한 방사체 및 검출기를 제공한다.

[0021] 본원에서 기술된 중간 대역-갭 태양 전지에 대한 새로운 해결방법은 계면에서의 전자 상태들의 혼합을 활용한다. 우선적으로 상태들의 혼합에 대한 모델이 제안된다. 그리고, 그 모델로부터 도출된 결론들을 중간 대역 태양 전지의 설계에 적용한다. 본 발명을 설명 또는 기술함에 있어 이하의 모델이 도움이 되더라도, 본 발명자들은 그러한 설명에만 제한되는 것을 원치 않는다. 따라서, 다른 모델들 및 이론들을 동등하게 적용할 수 있을 것이다.

[0022] 본원에서 사용된 "계면(interface)"이란 용어는 결정 배열에서의 임의의 중단을 일컫는다. 이러한 계면의 예들로는 상이한 결정상(crystalline phase) 간의 계면, 결정 물질과 비정질 물질 간의 계면, 고상(solid phase)과 기상(gaseous phase) 간의 계면, 고상과 액상(liquid phase) 간의 계면 등을 비롯하여, 결정면(crystalline plane) 간의 계면, 입자 경계 간의 계면 상 경계 간의 계면을 포함하지만, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0023] 이중접합에서, 주기적인 경계 조건들은 붕괴된다. 벌크 물질에서, 서로 다른 모멘텀 값을 갖는 전자파 함수들은 직교하여, 극단적으로 단순화한 1-차원(여기서는 "1-D"라고도 함)의 경우에,

수학식 1

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1(x) \Psi_2(x) dx = 0 .$$

[0024] 이 되고, 여기서, $\Psi_1(x)$ 및 $\Psi_2(x)$ 는 시간에 독립적인 전자파 함수이며, Bloch($u_{nk}(x)$) 함수 및 엔빌로프($e^{ik \cdot x}$) 함수의 곱(product)으로서,

수학식 2

$$\Psi(x) = e^{ik \cdot x} u_{nk}(x) .$$

[0026] 가 된다.

[0027] 삭제

[0028] 그러나, 격자(lattice)가 유한할 경우, 수학식 1은 더 이상 유효하지 않으며, 서로 다른 파동 함수들은 더 이상

직교하지 않는 것으로 간주되어질 수 있다. 따라서, 파동 함수 $\Psi(x) = e^{ikx} u_{nK}(x)$. 수들 간의 공간 중첩(V)은

수학식 3

$$V = \int_0^{Na} e^{ik_1 \cdot x}(x) e^{ik_2 \cdot x}(x) dx,$$

[0029]

[0030] 이 되고, 여기서 N은 구조체 내의 원자 격자들의 개수이고, a는 \hat{x} 방향으로의 격자 상수이다. 수학식 3에서, Bloch 함수들은 상태 1 및 2 모두에서 $k'=k+K$ 로 설정함으로써 명시적으로 포함되며, 여기서 k는 결정 격자 모멘텀이고 K는 역격자(reciprocal lattice) 벡터이다. $N < \infty$ 인 경우, 수학식 3에서의 적분(integral)은 0이 아닌(non-zero)일 수 있어, 차원이 감소하는 파동 함수들의 직교성의 붕괴를 반영한다.

[0031] 존(zone) 경계 및 존 중심에서의 1-D의 유한한 격자의 중첩 값들을 계산할 때, 전자파 함수들에 대한 고유값들은 코사인(cosine) 및 사인(sine) 형태이다. 두 상태의 중첩 함수를 계산하면, 3 가지의 가능한 사인 및 코사인의 조합이 나오는데, 즉 두 파동 함수는 코사인 형태이고, 두 파동 함수는 사인 형태이고, 하나의 파동 함수는 사인 형태이고 하나의 파동 함수는 코사인 형태이다. 이들 3 가지의 파동 함수들의 조합으로 아래의 수학식 4, 수학식 5 또는 수학식 6의 중첩 값이 유도된다.

수학식 4

$$V = \int_0^{Na} \sqrt{\frac{2}{Na}} \cos((K_1 + k_1)x) \sqrt{\frac{2}{Na}} \cos((K_2 + k_2)x) dx$$

$$= \frac{2}{Na} \left[\frac{Na \sin((K_1 - K_2 + k_1 - k_2)x)}{2(K_1 - K_2 + k_1 - k_2)} + \frac{\sin((K_1 + K_2 + k_1 + k_2)x)}{2(K_1 + K_2 + k_1 + k_2)} \right],$$

[0032]

수학식 5

$$V = \int_0^{Na} \sqrt{\frac{2}{Na}} \sin((K_1 + k_1)x) \sqrt{\frac{2}{Na}} \sin((K_2 + k_2)x) dx$$

$$= \frac{2}{Na} \left[\frac{Na \sin((K_1 - K_2 + k_1 - k_2)x)}{2(K_1 - K_2 + k_1 - k_2)} - \frac{\sin((K_1 + K_2 + k_1 + k_2)x)}{2(K_1 + K_2 + k_1 + k_2)} \right],$$

[0033]

수학식 6

$$V = \int_0^{Na} \sqrt{\frac{2}{Na}} \sin((K_1 + k_1)x) \sqrt{\frac{2}{Na}} \cos((K_2 + k_2)x) dx$$

$$= \frac{2}{Na} \left[\frac{Na \cos((K_1 - K_2 + k_1 - k_2)x)}{2(K_1 - K_2 + k_1 - k_2)} - \frac{\cos((K_1 + K_2 + k_1 + k_2)x)}{2(K_1 + K_2 + k_1 + k_2)} \right].$$

[0034]

[0035] $\sqrt{\frac{2}{Na}}$ 는 $K+k = k' \neq 0$ 에 대한 파동 함수들의 정규화 계수이다.

[0035]

[0036] $k = \pm \frac{\pi}{a}$ Brillouin 존 중심($k=0$)에서 및 Brillouin 존 에지($\frac{\pi}{a}$)에서, 수학식 4 및 5에서의 사인 항들은 모두 0이고, 중첩은 0이다. 그러므로, 초기 및 최종 상태 모두 존 경계 또는 존 중심에 있고 모두 사인이거나 모두 코사인 형태이며, 직교성 가설은 여전히 유효하며, 계면에서는 추가적인 커플링이 도입되지 않는다. 그러나, 하나의 파동 함수가 사인 형태이고 다른 파동 함수가 코사인 형태이면, 중첩 함수들이 중요할 수 있다. 단순한

[0036]

물질의 산포 관계에서, 두 가지의 전자 대역들이 존 에지 또는 존 중심에서 교차할 경우, 축퇴(degeneracy)가 분리되어 두 에너지 대역 중 큰 쪽이 코사인, 작은 쪽이 사인 형태가 된다. 이들 대역 쌍들은 대역 에지에서 또는 대역 중심에서 나타난다. 실제 물질에서 복소 기하(complex geometry)가 두 가지 상태를 혼합할 때 이런 개념(generalization)은 극히 단순화한 것이다. 그러나, 초기 상태가 대역 쌍 중 큰 에너지인 경우에는, 계산은 -초기 상태가 가장 강하게 결합할 수 있는(표면에서의 상태들의 혼합으로 인해) 상태들은 대역 쌍 중 작은 에너지를 갖는 상태들인 것- 을 나타낸다.

[0037] K_1 및 K_2 가 모두 $2\pi/a$ 의 배수이므로, 그들의 값은 수학적 식 6에서 코사인 항들의 값을 변경시키지 않을 것이다. 또한, 구조체가 짝수개의 원자를 가질 경우, a 는 짝수이고, 코사인 항들은 항상 1일 것이다. 그러므로, 구조체가 짝수개의 원자를 가지면, 수학적 식 6에서 괄호 내의 수식의 값은 $x=0$ 일 때와 $x=Na$ 일 때 동일할 것이다. 그러므로, 구조체가 짝수개의 원자를 가질 때 중첩은 0이 될 것이다.

[0038] 구조체가 홀수개의 원자(a 는 홀수)를 가지며 파동 함수 모두 존 경계 또는 존 중심에 있으면, $k'_1 - k'_2$ 은 $\frac{2\pi}{a}$ 의 배수이다. 이로써, 수학적 식 6에서의 코사인 항들 모두 1이고, 수학적 식 6에서의 적분은 0이 될 것이다(상태들이 항상된 결합을 갖지 않게 되는 것을 의미함). 그러나, 구조체가 홀수개의 원자를 가지며 초기 상태 또는 최종 상태가 존 중심에 있고, 다른 상태가 존 경계에 있으면, 수학적 식에서의 코사인 항들은 $x=Na$ 인 경우에는 -1이 될 것이고, $x=0$ 인 경우에는 1이 될 것이다. 이로써, a 가 홀수이고 하나의 파동 함수가 존 중심에 있고 하나는 존 경계에 있으면, 수학적 식 6에 의해 계산된 전자 상태 간의 공간 중첩은 널-제로이다. 이 모델을 요약하자면, 1) 초기 또는 최종 상태가 사인 형태이고 다른 상태가 코사인 형태인 경우, 2) 구조체 내의 원자들의 개수가 홀수인 경우 및 3) 하나의 파동 함수가 존 경계에 있고 하나는 존 중심에 있는 경우에만, 존 경계 또는 존 에지에서 초기 및 최종 상태에 대한 추가적인 커플링이 존재한다. 이들 결론은 높은 대칭 지점, 즉 존 중심 또는 존 경계에서의 상태에 대해서만이다.

[0039] 3차원에서는, 상황은 유사하지만, 더 복잡하다. 예를 들어, 표면 재구성을 고려할 필요가 있다. 또한, 이런 단순한 계산은 결정 격자 외부에 파동 함수의 존재 가능성이 없으며 계면의 다른 면 상에서의 물질과의 커플링이 존재하지 않는 것을 유도하는 무한 경계 가설을 이용한다. 1-D 및 무한 경계 가설 모두 진정한 결정(true crystal)을 대표하는 것은 아니지만, 이런 단순화된 모델을 주목함으로써 더 많은 직관(intuition)을 얻을 수 있다.

[0040] 원자가 홀수개인 경우와, 하나의 파동 함수가 존 중심에 있고, 하나는 존 경계에 있는 경우, 수학적 식 6을

수학적 식 7

$$V = \frac{2}{Na} \left(-\frac{1}{K_1 - K_2 + k_1 - k_2} - \frac{1}{K_1 + K_2 + k_1 + k_2} \right).$$

[0041]

[0042] 로 단순화시킬 수 있다.

$$m_1 = k'_1 \frac{a}{\pi} \quad m_2 = k'_2 \frac{a}{\pi} \quad \text{을 치환하면}$$

[0043]

수학적 식 8

$$V = \frac{2}{N\pi} \left(-\frac{1}{m_1 - m_2} - \frac{1}{m_1 + m_2} \right).$$

[0044]

[0045] 이 유도된다.

[0046] 수학적 식 8로부터 $m_1 = -1, 0, 1$ 및 13의 모멘텀 값을 갖는 초기 상태에 대한 공간 중첩 값들이 계산되었다. $m_1 - m_2$

이 짝수이면, 중첩은 0으로서, 이는 두 상태가 존 중심에 있거나, 또는 두 상태 모두가 존 에지에 있는 경우, 유한한 격자로 인해 추가적인 커플링이 유도되지 않는다는 것을 나타낸다. 또한, 최대 중첩을 갖는 상태 및, 표면 효과로 인해 최대 추가 커플링은 단지 π/a 만큼 다른 모멘텀 값을 갖는다. 직교성 가설의 붕괴는 중요할 수 있다. 특히, m_1 과 m_2 간의 차가 1로 감소함에 따라, 파동 함수들의 공간 중첩은 증가하여 0.85/N의 크기로 커진다. 이는 또한 단지 $m_1 - m_2$ 에만 종속되므로, $m_1 - m_2 = 1$ 인 경우, 극대화되는, 수학식 8의 제1항으로부터 알 수 있다. $m_1 = m_2$ 의 경우는 계산되지 않았는데, 그 이유는 그것이 그 자체로 상태의 중첩의 사소한 경우이기 때문이다.

[0047] 이들 계산은 또한 짝수인 $m_1 - m_2$ 상태에 대한 중첩 값들이 0인 것을 보여준다. 그러므로, 이전에 언급한 바와 같이, 상태들은 한 상태가 대역 중심에 있고 다른 상태가 대역 에지에 있는 경우에만 커플링 된다. 또한, m_1 의

값이 증가함에 따라, 최대 중첩 값은 감소한다. 상태 개수가 증가되면, $|m_1 - m_2| = 1$ 에 대한 중첩값은 $\frac{2}{\pi} \frac{1}{N}$ 의 값으로 수렴한다. 이런 극한에서는, 수학식 7에서의 제1항이 우세하며, 제2항은 0에 근접한다. 더 큰 k' 값을 갖는 상태가 사인 또는 코사인 함수인 것에 따라, 수학식 7의 제2항은 제1항의 값에 대해 가산 또는 감산 $\frac{\pi}{a}$ 된다. 그러므로, 고차수 대역은 사인 항과 코사인 항 간에서 더 작은 차를 갖게 될 것이지만, a 의 모멘텀 차를 갖는 상태들 간에서의 커플링은 여전히 상당할 것이다.

[0048] 나노구조의 경우에, 파동 함수들의 직교성의 붕괴는 중요해진다. 예를 들어, 실리콘 양자 도트(quantum dot)는 5nm 정도의 직경을 갖는다. 격자 상수가 0.356 nm이면, 이는 방향에 따라 직경으로 약 7 내지 9 원자에 상당한다. 본원에 기술된 모델과 함께 이것을 기본으로 이용하면, 수학식 8로부터 감마(Γ) 가전자대(제5 대역, $m_1 = 10$)에서 Brillouin 존 에지 전도대(제6 대역, $m_2 = 11$)까지의 전자파 함수들 간의 중첩이 계산되어 9 원자인 경우에는 7%가 되고 7 원자인 경우에는 9%가 된다.

[0049] 양자 구속 효과를 알기 위해, 양자 도트, 웰, 또는 와이어는 드브로이(de Broglie) 파장 및 자유 반송자(또는 임의 경우에는 여기자)의 평균 자유 행로 정도 또는 그 보다 작은 치수를 가져야 한다. 그러나, 계면에서 상당한 대역 혼합을 갖기 위해서는 단지 큰 표면적 대 체적비를 필요로 하지만, 양자 구속 효과는 요구되지 않는다. 그러므로, 단지 길이 스케일 요건은 평균 자유 행로이다. 그러므로, 물질의 치수는 드브로이 파장보다 클 수 있다. 드브로이 파장은 전자 에너지 대역의 E 대 k의 관계로부터 도출되는 자유 반송자의 유효 질량으로 결정된다. 평균 자유 행로는 대상으로 하는 물질 및 대역 뿐 아니라, 결합, 도펀트 및 온도에 좌우된다. 많은 물질들에서, 평균 자유 행로는 마이크로미터 정도인 한편, 드브로이 길이는 스케일은 통상적으로 수 십 옹스트롬 범위이고 유효 질량이 매우 작은 물질에서는 약 500 옹스트롬 만큼 높을 수 있다. 따라서, 이런 표면 효과를 활용하면 양자 구속으로 인해 생겨나는 이런 효과들만큼 항상 작은 치수를 필요로 하지는 않는다. 이 점은 장치의 치수들이 감소되면 전지의 비용은 증가하므로, 광전지 응용 분야에서 중요하다.

[0050] 표면에서의 상태들의 혼합은 다수의 여러 응용분야에 영향을 미치는 다수의 밀접한 관계 및 잠재성을 갖는다. 따라서, 본 발명은 이러한 효과를 이용하여 본질적으로 이중 대역 갭 물질을 생성함으로써 이론적으로 최대한 광전지 효율을 증가시키는 나노-와이어 태양 전지를 제공한다.

[0051] 중간 대역 태양 전지는 계면에서의 벌크 상태들의 혼합을 이용함으로써 설계될 수 있다. 중간 태양 전지의 설계 시, 여러 양상들을 고려해 볼 필요가 있다.

[0052] 우선, 계면에서의 벌크 대역 상태들의 혼합을 이용하기 위해, 입사광의 전계는 계면에 수직일 필요가 있다. 표면에서의 전자 상태들의 혼합은 표면에 수직인 모멘텀 성분을 갖는 상태들에서만 나타날 것이다. 표면과 평행인 전자 상태들의 경우에는, 무한 격자 근사가 여전히 유효하므로, 이 상태들은 직교 상태로 남아 있고, 벌크 상태들은 여전히 양호한 고유벡터(eigenvector)로 남는다. 전통적인 방법을 이용하여 성장시킨 나노-웰(310)의 경우, 양자 방향은 샘플 평면에 대해 수직이다. 그러므로, 도 1의 a에 도시된 바와 같이, 나노-웰(310)의 면(side)으로부터 빛이 입사될 필요가 있다. 따라서, 나노-웰(310) 샘플은 한 방향으로 전계를 갖고 입사하는 광자에 대해서만 흡수 및 대역 혼합을 위한 소규모의 횡단면적을 갖는다(도 1의 a). 도 1의 b에 도시된 나노-도트(320)에서는, 전계는 항상 계면에 수직일 것이다. 그러나, 광전지 장치들은 상부 전극 및 하부 전극 간에서의 전도(conduction)를 필요로 한다. 나노-도트(320)는 터널링(tunneling) 또는 호핑(hopping)을 통해 전도가

발생한다는 단점을 갖는다. 그래서, 나노-도트(320)에서의 자유 반송자의 이동도가 더 낮다. 한편, 정렬된 나노-와이어(도 1의 c)는 연속 전도 경로의 요건을 만족시키며, 입사된 광자 모두가 계면에 수직인 전계를 갖는다.

[0053] 복수의 나노-와이어(334)를 포함하는, 태양 전지, LED 등의 광전 장치(330)가 도 1의 c에 개략적으로 도시되어 있다. 정렬된 나노-와이어(334)는 투명 도체(332)와 고체 도체(336) 간에 배치된다. 투명 도체(332) 및 고체 도체(336)는 당 분야에 공지되어 있는 물질로 형성된다. 나노-와이어(334) 사이에는, 예를 들어, 절연 물질(338)이 배치될 수 있다.

[0054] 나노-와이어에서, 법선 입사광의 경우 광자들의 전계가 항상 계면에 수직이더라도, 단지 극히 한정된 표면 방향만이 바람직한 대역들의 혼합을 향상시킬 것이다. 그래서, 와이어들의 배향을 최적화시킬 필요가 있다. 이런 양상에 대해서는 이하에서 기술하기로 한다.

[0055] 중간 대역 태양 전지를 형성하는 물질을 또한 고려할 필요가 있다. 처리 및 비용 문제점 이외에도, 전도대 및 중간 대역 에너지들 모두 수용가능한 에너지를 갖는 물질을 선택해야 한다. 즉, (가전자대에 대한) 중간 대역 및 전도대의 에너지는 고효율을 얻을 수 있는 결합이어야 한다. 또한, 대상이 되는 전자 에너지 대역들이 비-방사 재결합 경로를 갖지 않거나, 적어도 매우 느린 재결합 경로를 갖는 물질을 선택해야 한다. 예를 들어, E 대 k 다이어그램에서의 새들점(saddle point)은 중간 대역으로서 사용될 수 없다. 비록 이런 요건이 일부 물질을 직접적으로 배제시키더라도, 결론적으로는 실험적인 증거에 의해서만 비-방사 재결합 경로의 부재를 입증할 수 있다.

[0056] 에너지 준위가 중간 대역 태양 전지의 이상적인 것에 가까운 한 물질이 실리콘이다. 또한, 실리콘에서 대상이 되는 에너지 대역은 그들 간에 명백한 비-방사 재결합 경로를 갖지 않는다. 실리콘의 감마(Γ) 대 델타(Δ)의 간접 대역 갭은 1.17eV인 반면, Γ 대 L 점 전이는 약 1.65eV와 약 2.29eV 사이에 있다.

[0057] 더 낮은 에너지 대역 갭에서 흡수되는 고-에너지 광자들의 백분율을 최소화하기 위해, 와이어 직경은 더 큰 대역 갭의 에너지 이상에서의 흡수가 더 높은 에너지 대역에 의해 지배되도록 충분히 작아야 한다. 이러한 더 높은 에너지 대역 흡수의 증가는 두 대역 갭 중 더 큰 대역 갭의 에너지보다 큰 에너지를 갖는 광자들이 더 낮은 에너지 대역 보다는 더 높은 에너지 대역 내로 흡수되는 것을 보장할 것이며, 여기서 과잉 에너지는 방사로 소실될 것이다.

[0058] 표면으로부터 멀리 떨어진 둘 이상의 평균 자유 행정인 전자(또는 정공)는 표면에서는 "발견되지" 않을 것이므로, 벌크 상태들의 혼합을 경험하지 않을 것이다. 따라서, 흡수 계수는 단순히 표면으로부터 멀리 떨어진 평균 자유 행정 보다 긴 거리에서의 벌크값이 될 것이다. 표면에 수직인 전계를 갖는 빛의 경우, 유효 흡수 계수는 표면과 벌크 흡수 계수의 가중된 합으로 근사화될 수 있다. 1-D 표면 (나노-웰)의 경우, 측정된 유효 흡수 계수는 아래 수학적 식 9의 적분에 의해 구해지며,

수학적 식 9

$$A_{tot}(\omega) = \frac{A_{bulk}(\omega)d + \int_0^d A_{surface}(\omega) \exp\left(\frac{-x}{MFP}\right) dx}{d},$$

[0059]

[0060] 여기서, $A_{tot}(\omega)$, $A_{bulk}(\omega)$ 및 $A_{surface}(\omega)$ 는 각각 유효 계수, 벌크 계수 및 흡수 계수이며, MFP는 자유 반송자들의 평균 자유 행정이며, d는 물질의 두께이다.

[0061] 수학적 식 9로부터, 높은 에너지 대역으로부터 광 흡수를 충분히 증가시키는 데 필요한 와이어 직경을 구할 수 있다. 그러나, 고차수 대역의 평균 자유 행정, 벌크에서 더 높은 에너지 대역의 (커플링에 관련된) 흡수 및 계면에서의 두 상태들의 혼합은 통상적으로 알려져 있지 않다. 그러므로, 와이어 직경 임계치는 대부분 이론으로부터의 안내에 따라 경험적으로 정해질 가능성이 높다.

[0062] 나노-와이어(334)의 방향 또한 주의 깊게 선택되어야 한다. 본원에서 기술된 바와 같이, 나노-와이어(334)의 방향은 나노-와이어(334)의 주 축(즉, 길이)을 따르는 나노-와이어(334)의 결정 배향을 일컫는다. 중간 대역 태양 전지에서, 더 큰 에너지 대역 전이의 흡수는 또 다른 대역 전이의 흡수 계수가 증첩될 때 두 개의 더 작은

에너지 대역 전이의 흡수 계수보다 훨씬 더 강해야 한다. 그러므로, 더 큰 에너지 대역 전이(즉, 가전자대에서 전도대로의 전이)의 흡수는 증가시키고 더 작은 에너지 대역 전이(즉, 가전자대에서 중간 대역으로의 전이 및 중간 대역에서 전도대로의 전이)의 흡수는 증가시키지 않는 것이 바람직하다.

[0063] 실리콘의 경우, Γ -점 가전자대에서 L-점 전도대로의 전자 전이는 증가시킬 필요가 있다. Brillouin 존에서 Γ -점은 $\langle 000 \rangle$ 인 한편, L-점은 $\langle 111 \rangle$, $\langle -111 \rangle$, $\langle 1-11 \rangle$, 및 $\langle 11-1 \rangle$ 결정 방향의 전자 포켓을 갖는 4 가지 폴드 축퇴(four fold degenerate)이다. 나노-와이어(334)의 표면이 이런 전이의 대칭 요건을 붕괴시키도록, 표면 법선은 두 개의 높은 대칭점의 방향 간의 차의 방향으로의 벡터와 평행해야 한다. 실리콘의 경우, 이는 나노-와이어(334) 방향이 $\langle 111 \rangle$, $\langle -111 \rangle$, $\langle 1-11 \rangle$, 또는 $\langle 11-1 \rangle$ 결정 방향에 수직이어야 하는 것을 의미한다. $\langle hkl \rangle$ 결정 배향에서 주 축, 즉 길이를 갖는 와이어의 경우, $h+k+l=0$, $-h+k+l=0$, $h-k+l=0$ 또는 $h+k-l=0$ 이다. 또한, 나노-와이어(334)는 Γ -점 가전자대에서 Δ 점 중간 대역으로의 전자 전이가 증가되지 않도록 Γ -점과 Δ 점 간의 차의 방향에 수직이어서는 안 된다. 따라서, 나노-와이어(334)는 $h \neq 0$, $k \neq 0$, 및 $l \neq 0$ 인 경우에 대응하는, $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$ 및 $\langle 001 \rangle$ 결정 방향에 수직이어서는 안 된다. 이들 두 요건은 또한 아래의 수학적 식 10a, 10b, 및 10c에서 증명된 바와 같이, 중간 대역에서 전도대가 증가하지 않는 것을 보장한다.

수학적 식 10a

$$\vec{W} \cdot (\vec{V} - \vec{C}) = 0$$

수학적 식 10b

$$\vec{W} \cdot (\vec{V} - \vec{I}) \neq 0$$

수학적 식 10c

$$\vec{W} \cdot (\vec{C} - \vec{I}) = \vec{W} \cdot ((\vec{V} - \vec{I}) - (\vec{V} - \vec{C})) = \vec{W} \cdot (\vec{V} - \vec{I}) \neq 0,$$

여기서, \vec{W} 는 와이어 축 방향으로의 벡터이고, \vec{V} , \vec{C} 및 \vec{I} 는 각각 가전자 전자 포켓, 전도 전자 포켓 및 중간 전자 포켓 방향으로의 벡터이다. 수학적 식 10a는 와이어 축 방향이 가전자대와 전도대 간의 차의 방향에 수직인 조건을 표현한 것이다. 수학적 식 10b는 와이어 축 방향이 가전자대와 전도대 간의 차의 방향에 수직이 아닌 조건을 표현한 것이다. 수학적 식 10c는 수학적 식 10a 및 수학적 식 10b가 주어지면, 나노-와이어(334)의 축 방향은 또한 가전자대와 전도대 간의 차의 방향에 수직이어서는 안 되는 것을 보여준다. 이들 요건을 만족시키는 실리콘 나노-와이어 방향의 예로 $\langle 1-21 \rangle$, $\langle 211 \rangle$, $\langle 121 \rangle$ 및 $\langle 112 \rangle$ 방향을 포함한다. 4 개의 Γ -점에서 L-점으로의 전이들 중 오직 하나만이 주어진 와이어 방향에서 증가되는 것에 주목해야 한다.

[0068] 본 발명은 커다란 표면적을 갖는 물질을 형성함으로써 간접 전이의 커플링을 증가시키는 메커니즘을 탐구한다. 증가는 E 대 k 다이어그램을 도출하는 데 관례대로 사용되는 직교성 가설의 붕괴에 의한다. 이런 효과를 관찰하는 데 필요한 치수는 평균 자유 행정 및 드브로이 파장의 최소치로 결정되는 양자 효과와는 달리, 평균 자유 행정으로 정해진다. 그래서, 이런 효과는 반드시 양자 구속 효과에 필요한 것만큼 작은 치수를 갖는 나노구조의 물질들을 필요로 하는 것은 아니다. 이런 메커니즘의 모델은 초기 상태 또는 최종 상태가 사인 형태이고 다른 상태가 코사인 형태일 때, 표면 방향으로의 원자의 수가 홀수이고, 하나의 전자 상태가 존 경계에 있고 다른 상태는 존 중심에 있으며, 대역들 간의 결합이 증가된 것을 보여준다. 증가는 표면에 수직인 전계 성분을 갖는

광자 및 표면 방향이 커플링을 허용하는 전자 전이들에 대해서만이다. 증가는 k' 의 차가 $\pm \frac{\pi}{a}$ 인 초기 상태 및 최종 상태에서 최대화된다.

[0069] 이로써, 광전 변환 장치에 상태들의 혼합으로 인한 흡수 증가를 적용된다. 계면에서의 대역들의 혼합을 이용하여 도 1의 c에 도시된 중간 대역 갭 태양 전지가 설계된다. 이 장치는 $\langle 121 \rangle$ 방향으로 정렬된 나노-와이어(330)를 포함한다. 나노-와이어(330)는 실리콘을 포함한다.

[0070] 이하의 예측 가능한 예들은 본 발명의 특징 및 이점들을 예시한 것으로, 본 발명을 이것에만 한정시키려는 의도는 아니다.

[0071] **예 1 비스무스를 이용한 중간 적외선(Mid-IR) 검출기 또는 방사체**

[0072] 비스무스는 도 2b에 도시된, 매우 예외적인 대역 구조를 갖는 협대역 갭 반-금속이다. T점 가전자대는 페르미 에너지(E_F)를 교차하여, 대역 에지는 페르미 에너지 위에 위치되어 많은 빈 전자 상태(정공)를 남긴다. L점 가전자대 에지는 페르미 에너지 아래에 위치하므로, 대부분 전자들로 채워진다. 이들 상태 모두 동일한 방향으로 (가전자대 및 전도대 쌍과는 대조적으로) 만곡(curved)되어 있으므로, 상태들의 집합 밀도가 크다. 또한, T점에 정공 포켓이 존재하고 L점에는 전자 포켓이 존재하므로, 다수의 전자가 L점 가전자대에서 T점 가전자대로 여기될 수 있다. 그러나, 벌크 비스무스에서는, 실온에서 약 0.13eV인 것으로 예측되는 이런 전이는 간접적이며 미약하다.

[0073] 비스무스 나노-와이어에서, 대칭 논의가 중단되고, L점에서 T점으로의 전이가 허용된다. 그래서, 비스무스 나노-와이어는 L점에서의 전자로부터 T점에서의 정공으로의 여기로 인한 매우 크고 강렬한 광 흡수를 갖는다. 이 강하고 협소한 흡수는 $\langle 101 \rangle$ 및 $\langle 012 \rangle$ 배향(도 2a)을 갖는 나노-와이어의 0.12eV에서 관찰된다. 이들 와이어 방향 모두 T - L 방향에 수직인 계면을 갖는다. L점 및 T점 방향은 $\langle 111 \rangle$, $\langle -111 \rangle$, $\langle 1-11 \rangle$ 및 $\langle 11-1 \rangle$ 이며, 이들 방향 중 하나는 T점 방향이고 다른 세 방향은 L점 방향이다. T점에 대한 선택은 임의적이다. 예를 들어, $\langle 111 \rangle - \langle -111 \rangle = \langle 200 \rangle$ 이며, 이는 와이어 배향 $\langle 012 \rangle$ 에 수직이다. 다른 예로, $\langle 111 \rangle - \langle 1-11 \rangle = \langle 020 \rangle$ 이며, 이는 와이어 배향 $\langle 101 \rangle$ 에 수직이다. 그러므로, 와이어 방향 $\langle 101 \rangle$ 및 $\langle 012 \rangle$ 모두는 L점과 T점을 커플링 해야 한다.

[0074] L점과 T점 간의 강한 커플링은 중간 적외선 검출기 또는 방사체를 제조하는 방법으로서 사용될 수 있다. 비스무스 나노-와이어에서는 단지 강한 흡수만이 측정된 반면, 발광 및 광 컨덕턴스는 아직 조사되지 않았다. 그러나, 비스무스 나노-와이어 또한 L에서 T로의 전자 전이의 결과로서 발광할 것이며 발광 응용분야에 유용하게 될 것 같다. 방출 에너지는 환경 관찰(monitors)에 중요한 파장인, 0.12eV($10\mu\text{m}$) 흡수 피크 부근인 것으로 예상된다. 그러나, 더 낮은 에너지 상태(L점 가전자대)에서 배이전시(vacancy)를 만들기 위해서는, 장치는 아마도 전자들이 L점 가전자대에서 L점 전도대로 여기하도록 펌핑되어야 할 것이다.

[0075] 나노-와이어는 다공성 양극 알루미늄의 전기 화학적 충전 및 압력 주입 기술에 의해 이미 만들어졌다. 200nm만 큼 큰 직경을 갖는 나노-와이어의 경우 0.12eV에서의 흡수 피크가 관찰되었고 와이어 직경 분포가 클 수 있으므로, 보다 용이한 제조 기술이 이용될 수 있다. 200 내지 50nm의 기공 크기를 갖는, 예를 들어, 양극 알루미늄 템플릿을 구매할 수 있다. 또한, 표준 리소그래피 기술을 이용하여 비스무스 나노-와이어의 어레이를 만들 수 있다.

[0076] 여기서 주어진 모든 예에서와 같이, 투명 상부 도전성 컨택트(332) 및 도전성 백 컨택트(336)를 갖는 특정한 방향으로 정렬된 나노-와이어의 어레이들은 본 발명의 범주 내에 있다.

[0077] **예 2 계면 혼합의 효과를 활용하는 실리콘 나노-와이어를 이용한 적색 방사체**

[0078] 실리콘 양자 구조들에서 광발광(photoluminescence)에 대한 여러 연구가 진행되고 있다. 이들 구조는 양자 도트를 포함하는 것으로 도시된, 비정질 실리콘을 포함한다.

[0079] 실리콘에 대해 관찰된 550nm 내지 700nm 간의 광발광을 설명하는 여러 이론들이 제안되었지만, 이들 이론 중 어느 것도 모든 데이터를 설명하지 못한다. 계면 혼합은 감마(Γ)와 L점 간의 결합을 향상시키며, 이런 전이는 관찰된 광발광을 유발시킬 가능성이 매우 높다. 이것이 실제로 원인이라면, 이 발광을 극대화하기 위한 이상적인 구조는, $\langle 111 \rangle$ 방향의 계면 및 단지 약간의 도핑 레벨(너무 높은 도핑은 광발광을 관찰하는 데 필요한 직경을 감소시킬 것이므로)을 갖는 고순도 실리콘을 포함할 것이다.

[0080] **예 3: 계면 혼합을 활용한 실리콘 나노-와이어를 이용한 중간 대역 태양 전지**

[0081] 제안된 중간 대역 태양 전지를 제조하는 한 방법은 두 반도체 간에 양자 도트들을 개재시키는 것이다. 그러나, 양자 도트와의 전기적 접촉을 이루기는 매우 쉽다. 계면 혼합을 활용함에 의해, 단일 물질을 이용하여 중간 대역 태양 전지에 두 가지 준위를 제공할 수 있다. 접지 상태와 여기된 두 상태 간의 결합 강도는 나노-와이어(330)의 배향 및 직경을 변경함으로써 태양 전지 효율에 대해 최적화될 수 있다. 동시에, 실리콘은 중간 대역

태양 전지에 대한 최적 에너지에 매우 가까이에서 함께 있는 두 가지 대역 갭을 가지고 있다. 가장 작은 대역 갭은 X 방향의 델타점에서의 1.12eV이다. 다른 반송자 포켓은 L점에 존재하고 1.6eV와 2.1eV 사이인 것으로 추정된다. 계산에 기초하여, 1.12eV와 1.9eV에서 대역 갭을 가지며, 60%가 넘는 효율을 갖는 중간 대역 갭 태양 전지가 예측되었다.

[0082] Γ 점에서 Δ 점으로의 전이에 관련하여 Γ 점에서 Δ 점으로의 커플링을 증가시키기 위해, 계면은 $\langle 100 \rangle$ (X) 방향으로가 아니라, $\langle 111 \rangle$ (L) 방향에 수직일 필요가 있을 것이다. $\langle hkl \rangle$ 결정 배향으로의 주 축, 즉 길이를 갖는 와이어의 경우, $h+k+l=0$, $-h+k+l=0$, $h-k+l=0$, 또는 $h+k-l=0$, 및 $h \neq 0, k \neq 0$ 및 $l \neq 0$ 이다. 예를 들어, $\langle 11-2 \rangle$ 방향으로의 와이어는 Γ 점을 X점에 커플링하는 것이 아니라, Γ 점을 L점에 커플링 시킬 것이다. 와이어 직경이 줄어들수록, 커플링의 세기는 커진다. 이전에는 광냉광에 약 5nm 및 그 이하의 나노-치수를 갖는 나노-입자들이 필요하다고 알려졌다. 그러나, 나노-입자들은 약 5nm의 간격으로 도펀트들이 분리되어 있는 도핑된 샘플들로 구성되었다. 도펀트들은 전자들을 산란시킴으로써 계면으로부터의 전자들을 효과적으로 차폐시킬 수 있다. 도펀트들이 활성 영역에서 벗어난, 도핑 레벨을 감소시키거나 또는 델타 도핑 등과 같은 기술을 사용함으로써, 임계 직경을 증가시킬 수 있어 제조를 보다 용이하게 한다. 실제로 직경이 6nm 근방일 필요가 있는 경우, 마스크로서 금속 나노-도트를 이용하고, 실리콘을 반응성 이온 에칭으로 에칭하고, 향상된 전자-빔(e-beam) 리소그래피, 양극 알루미늄의 기공을 전기 화학적으로 충전하는 등의 다른 제조 기술이 사용될 수 있다.

[0083] 예 4. 아연 나노-와이어로부터의 청색 또는 근자외선 방사체

[0084] 아연은 다소 복잡한 전자 대역 구조를 갖는 금속이다. 도 3에 관련 대역들이 도시된다. 도 3에 도시된 대역 다이어그램에 기초하여, 나노구조화된 아연에서의 Γ 전도대와 L점 전도대 간의 전이는 계면 혼합으로 인해 강한 흡수 및 발광을 나타낼 것으로 예상된다. 비스무스에서와 같이, 초기 및 최종 상태 모두 동일 방향으로만 곡되어 있어, 큰 상태 밀도를 형성한다. 또한 비스무스에서와 같이, 대역들 중 하나는 페르미 에너지(E_F)와 교차하여 이런 전자 여기(excitation)에 많은 상태들이 이용가능해진다. 아연의 경우에, Γ 점 전도대는 페르미 에너지와 교차하여, 대역 에지는 전자들로 충만해진다. L점 전도대는 페르미 에너지 위에 존재하므로, 전자들이 여기되어질 수 있는 빈 상태로 충만해 있다. 다시 말해, 포켓들이 Γ 점 및 L점에 존재하여, 계면은 $\langle 111 \rangle$ 방향일 필요가 있다. 이 전이 에너지는 약 3eV이다. $\langle hkl \rangle$ 결정 배향으로의 주 축 또는 길이를 갖는 와이어의 경우, $h+k+l=0$, $-h+k+l=0$, $h-k+l=0$ 또는 $h+k-l=0$, 여기서 $h \neq 0, k \neq 0$, 및 $l \neq 0$.

[0085] 비록 이러한 효과를 관찰하기 위해 아연 나노결정이 얼마나 작아야 할 필요가 있는지는 확실하지 않지만, 아연 나노 결정의 치수는 실리콘의 치수보다는 비스무스의 치수와는 유사하다. 왜냐하면, 아연과 비스무스 모두 금속성이기 때문이다. 따라서, 본원에서 앞서 기술된 보다 용이한 제조 방법들은 검출기 또는 방사체에 사용될 수 있다.

[0086] 본원에서는 실리콘, 비스무스, 및 아연에 대한 계면에서의 전자 상태들의 혼합에 대해 기술하였지만, 아연 셀라이드, 인듐 포스파이드, 인듐 아세나이드 등의 다른 물질들도 유사한 거동을 나타낼 것으로 기대된다.

[0087] 비록 예시의 목적으로 전형적인 실시예들이 기술되었지만, 앞서의 실시예들이 본 발명의 범주를 한정하는 것으로 간주되어서는 안 된다. 따라서, 당 분야의 숙련자라면 본 발명의 사상 및 범주를 벗어나지 않는 한 다양한 수정, 변형 및 대체 실시예들이 가능하다.

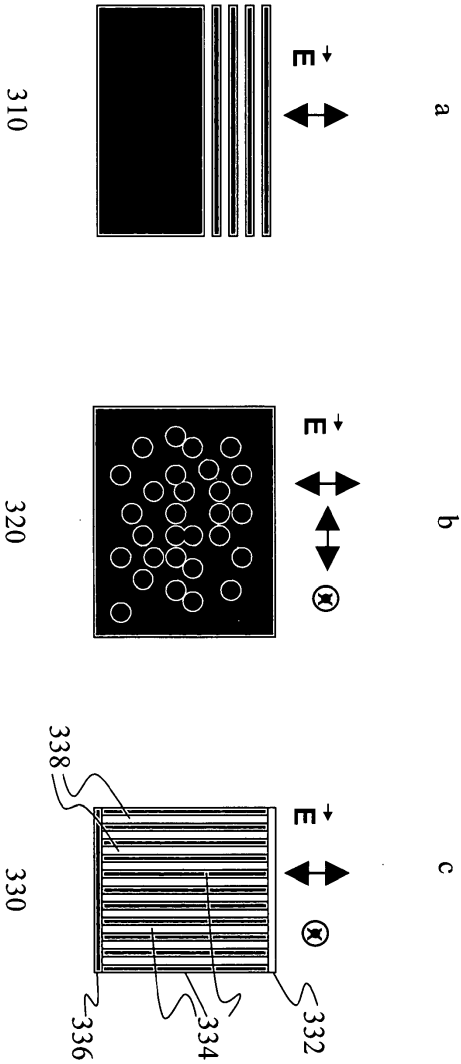
도면의 간단한 설명

[0014] 도 1은 표면 효과(surface effect)로 인해 상태들의 혼합을 유도하게 될 전계의 방향을 나타내는, a) 나노-웰, b) 나노-도트 및 c) 나노-와이어 구조에 대한 개략도.

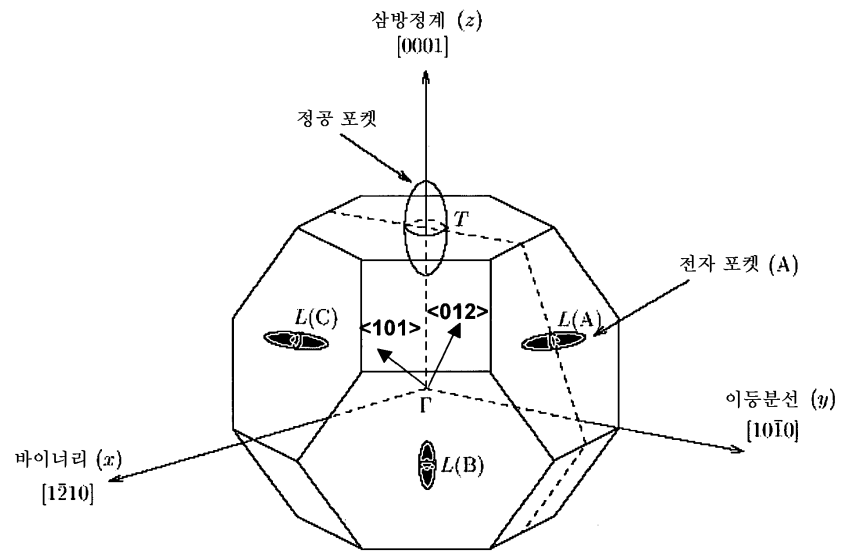
[0015] 도 2는 비스무스에서의 a) T 가전자대, Γ 대역 및 비스무스 내의 $\langle 012 \rangle$ 배향, 그리고 b) 비스무스의 전자 대역 구조의 개략도.

[0016] 도 3은 아연의 전자 대역 구조의 개략도.

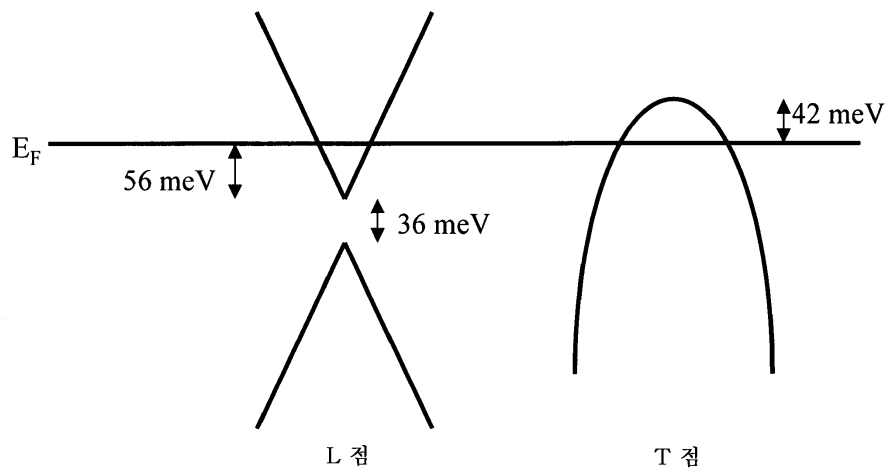
도면
도면1



도면2a



도면2b



도면3

